

(19)日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11)特許出願公開番号

特開2002-132506

(P2002-132506A)

(43)公開日 平成14年5月10日(2002.5.10)

(51)Int.Cl.	識別記号	FI	キーワード(参考)
G 0 6 F 9/44	5 8 0	G 0 6 F 9/44	5 8 0 P 2 G 0 4 5
G 0 1 N 33/48		G 0 1 N 33/48	Z 4 B 0 2 4
33/50		33/50	P 5 B 0 7 5
G 0 6 F 17/30	1 7 0	G 0 6 F 17/30	1 7 0 F
1 8 0			1 8 0 A

審査請求 未請求 請求項の数9 OL (全 17 頁) 最終頁に続く

(21)出願番号 特願2000-329868(P2000-329868)

(22)出願日 平成12年10月30日(2000.10.30)

(71)出願人 393031586

株式会社国際電気通信基礎技術研究所  
京都府相楽郡精華町光台二丁目2番地2

(72)発明者 邊見 均

京都府相楽郡精華町光台二丁目2番地2  
株式会社国際電気通信基礎技術研究所内

(72)発明者 真栄城 哲也

京都府相楽郡精華町光台二丁目2番地2  
株式会社国際電気通信基礎技術研究所内

(74)代理人 100098305

弁理士 福島 祥人 (外1名)

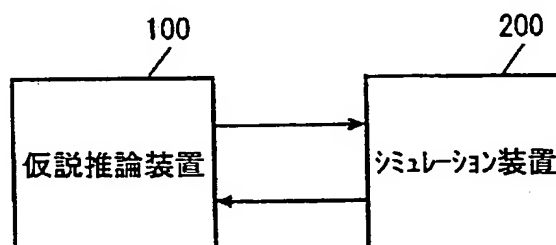
最終頁に続く

(54)【発明の名称】 仮説シミュレーション装置および仮説シミュレーション方法

(57)【要約】

【課題】 知識として蓄積されている情報から推論された仮説を検証して知識として蓄積されている情報を自己組織化することができる仮説シミュレーション装置および仮説シミュレーション方法を提供する。

【解決手段】 仮説推論装置100は、知識情報を用いて推論により仮説を生成し、シミュレーション装置200は、仮説推論装置100により生成された仮説をシミュレーションし、さらに、仮説推論装置100は、シミュレーション装置200によりシミュレーションされた結果を用いて知識情報を組織化する。



## 【特許請求の範囲】

【請求項 1】 知識として蓄積されている情報を用いて推論により仮説を生成する仮説推論装置と、前記仮説推論装置により生成された仮説をシミュレーションするシミュレーション装置とを備え、前記仮説推論装置は、前記シミュレーション装置によりシミュレーションされた結果を用いて前記知識として蓄積されている情報を組織化することを特徴とする仮説シミュレーション装置。

【請求項 2】 前記仮説推論装置は、1つの情報を当該情報と関連する他の情報との意味関係を記述する複数のルールと対応付け、均質化 2 部グラフモデルにより表現される複数の情報を構造化して記録する記録手段と、検索すべき情報を入力する入力手段と、前記記録手段に記録されている情報から前記入力手段により入力された情報を検索し、検索した情報に対応付けられているルールに基づき関連する情報を検索する検索手段と、前記検索手段により検索された情報を出力する出力手段とを備えることを特徴とする請求項 1 記載の仮説シミュレーション装置。

【請求項 3】 前記ルールは、対応付けられている情報のタイプを表すタイプ情報ごとに記録され、前記ルールの各々は、当該ルールが対応付けられている情報への入力パターンを規定する入力パターン情報と、前記入力パターン情報に対応付けられた出力パターン情報とを含み、

前記検索手段は、検索した情報への入力パターンが検索した情報に対応付けられているルールの入力パターン情報に規定される入力パターンと一致する場合、一致した入力パターン情報に対応付けられている出力パターン情報に応じて次の情報を検索することを特徴とする請求項 2 記載の仮説シミュレーション装置。

【請求項 4】 前記出力パターン情報は、次に検索される情報を表す識別情報と、前記識別情報により表される情報のタイプを表すタイプ情報と、検索された情報に対する前記識別情報により表される情報の役割を表す役割情報とを含み、

前記入力パターン情報は、検索された情報へ到達する前の情報を表す識別情報と、検索された情報に対する前記識別情報により表される情報の役割を表す役割情報とを含み、

前記検索手段は、検索した情報のタイプ情報に一致するルールに含まれる入力パターン情報の識別情報および役割情報が検索した情報に到達する前の情報の識別情報および役割情報に一致する場合、当該入力パターン情報に対応付けられている出力パターン情報に含まれる識別情報が表す情報を検索することを特徴とする請求項 3 記載の仮説シミュレーション装置。

【請求項 5】 前記シミュレーション装置は、化学反応による物質の変化量をシミュレーションする化学反応シミュレーション装置を含み、

前記化学反応シミュレーション装置は、各物質の数をカウントし、各カウント値が各物質の数を表すカウント手段と、

化学反応の進行状態に応じて、前記カウント手段の化学反応前の各物質のカウント値を減少させるとともに、前記カウント手段の化学反応後の各物質のカウント値を増加させる増加／減少手段とを備えることを特徴とする請求項 1～4 のいずれかに記載の仮説シミュレーション装置。

【請求項 6】 前記カウント手段は、物質ごとに設けられ、カウント値が物質の数を表す複数の物質カウント手段を含み、

前記増加／減少手段は、

化学反応ごとに設けられ、化学反応の進行状態に応じて、化学反応前の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値を減少させるとともに、化学反応後の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値を増加させる複数の反応実行手段と、

前記反応実行手段の化学反応に応じて前記反応実行手段と前記物質カウント手段とを接続する接続手段とを含むことを特徴とする請求項 5 記載の仮説シミュレーション装置。

【請求項 7】 前記増加／減少手段は、所定の乱数を発生させる乱数発生手段をさらに含み、

前記反応実行手段は、前記乱数発生手段から出力される乱数に応じて化学反応前の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値を減少させるとともに、化学反応後の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値を増加させることを特徴とする請求項 6 記載の仮説シミュレーション装置。

【請求項 8】 前記増加／減少手段は、化学反応に寄与する触媒物質ごとに設けられ、カウント値が触媒物質の数を表す複数の触媒カウント手段をさらに含み、

前記反応実行手段は、前記触媒カウント手段のカウント値に応じて化学反応前の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値を減少させるとともに、化学反応後の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値を増加させることを特徴とする請求項 6 または 7 記載の仮説シミュレーション装置。

【請求項 9】 知識として蓄積されている情報を用いて推論により仮説を生成するステップと、生成された仮説をシミュレーションするステップと、シミュレーションされた結果を用いて前記知識として蓄積されている情報を組織化するステップとを含むことを特徴とする仮説シミュレーション方法。

【発明の詳細な説明】

50 【0001】

【発明の属する技術分野】本発明は、推論により生成した仮説をシミュレーションする仮説シミュレーション装置および仮説シミュレーション方法に関するものである。

【0002】

【従来の技術】近年、遺伝病や成人病等の遺伝子レベルでの診断および治療等を目的として、世界的に大規模なゲノムの塩基配列解析が行われている。ここで、ゲノムとは、生命活動を行う上で必要なすべての遺伝子を持った1組の染色体であり、人の場合、2組の染色体を有しており、2つのゲノムを持っている。1つのゲノムは、約30億個の塩基対からなり、1つの細胞内にある約60億個の塩基対の総延長距離は、約1.8mであり、そのDNA（デオキシリボ核酸）が人の細胞約60億個のすべてに存在する。

【0003】

【発明が解決しようとする課題】しかしながら、上記のように非常に多くのDNAを解析して膨大なゲノムデータを統合および分類し、機能的に関連のある遺伝子群からなる遺伝子ネットワークを解析する作業を実際に行っ

たのでは、あまりにも長時間を要し、現実的ではない。【0004】本発明の目的は、知識として蓄積されている情報から推論された仮説を検証して知識として蓄積されている情報を自己組織化することができる仮説シミュレーション装置および仮説シミュレーション方法を提供することである。

【0005】

【課題を解決するための手段および発明の効果】（1）第1の発明

第1の発明に係る仮説シミュレーション装置は、知識として蓄積されている情報を用いて推論により仮説を生成する仮説推論装置と、仮説推論装置により生成された仮説をシミュレーションするシミュレーション装置とを備え、仮説推論装置は、シミュレーション装置によりシミュレーションされた結果を用いて知識として蓄積されている情報を組織化するものである。

【0006】本発明に係る仮説シミュレーション装置においては、知識として蓄積されている情報を用いて推論により仮説が生成され、生成された仮説がシミュレーションされ、シミュレーションされた結果を用いて知識として蓄積されている情報が組織化されるので、知識として蓄積されている情報から推論された仮説を検証して知識として蓄積されている情報を自己組織化することができる。

【0007】（2）第2の発明

第2の発明に係る仮説シミュレーション装置は、第1の発明に係る仮説シミュレーション装置の構成において、仮説推論装置は、1つの情報を当該情報と関連する他の情報との意味関係を記述する複数のルールと対応付け、均質化2部グラフモデルにより表現される複数の情報を

構造化して記録する記録手段と、検索すべき情報を入力する入力手段と、記録手段に記録されている情報から入力手段により入力された情報を検索し、検索した情報に対応付けられているルールに基づき関連する情報を検索する検索手段と、検索手段により検索された情報を出力する出力手段とを備えるものである。

【0008】この場合、均質化2部グラフモデルにより表現される複数の情報の各々が当該情報と関連する他の情報との意味関係を記述する複数のルールと対応付けられて記録され、記録された情報の中から検索すべき情報が検索され、検索した情報に対応付けられているルールに基づき関連する他の情報が検索され、検索された各情報が出力される。

【0009】このとき、ルールにより情報間の意味関係を記述することができるため、各情報に対応付けられた複数のルールにより1つの情報を複数の観点から表現することができる。したがって、複数の観点から情報を検索することができるとともに、当該ルールを統合することにより既に構築した他のデータベースと統合することができる。この結果、多様な観点から種々の情報を検索することができるとともに、データベース間の統合を容易に行うことができる。

【0010】（3）第3の発明

第3の発明に係る仮説シミュレーション装置は、第2の発明に係る仮説シミュレーション装置の構成において、ルールは、対応付けられている情報のタイプを表すタイプ情報ごとに記録され、ルールの各々は、当該ルールが対応付けられている情報への入力パターンを規定する入力パターン情報と、入力パターン情報に対応付けられた出力パターン情報とを含み、検索手段は、検索した情報への入力パターンが検索した情報に対応付けられているルールの入力パターン情報に規定される入力パターンと一致する場合、一致した入力パターン情報に対応付けられている出力パターン情報に応じて次の情報を検索するものである。

【0011】この場合、各ルールが対応付けられている情報のタイプごとに分類され、当該情報のタイプに応じて種々の観点から情報を検索することができる。また、検索した情報への入力パターンが入力パターン情報の入力パターンと一致する場合に当該入力パターン情報に対応付けられた出力パターン情報に応じて次の情報を検索しているので、複数のルールの中から利用者の意図する観点到適合するルールに応じて次の情報を検索することができ、入力した情報に関連する情報を順次検索して出力することができる。

【0012】（4）第4の発明

第4の発明に係る仮説シミュレーション装置は、第3の発明に係る仮説シミュレーション装置の構成において、出力パターン情報は、次に検索される情報を表す識別情報と、識別情報により表される情報のタイプを表すタイ

10

20

30

40

50

ブ情報と、検索された情報に対する識別情報により表される情報の役割を表す役割情報とを含み、入力パターン情報は、検索された情報へ到達する前の情報を表す識別情報と、検索された情報に対する識別情報により表される情報の役割を表す役割情報とを含み、検索手段は、検索した情報のタイプ情報に一致するルールに含まれる入力パターン情報の識別情報および役割情報が検索した情報に到達する前の情報の識別情報および役割情報に一致する場合、当該入力パターン情報に対応付けられている出力パターン情報に含まれる識別情報が表す情報を検索するものである。

【0013】この場合、入力パターン情報および出力パターン情報に情報の役割を表す役割情報が付加されているので、この役割情報により情報間の意味関係を完全に記述することができる。したがって、検索した情報のタイプ情報に一致するルールに含まれる入力パターン情報の識別情報および役割情報が検索した情報に到達する前の情報の識別情報および役割情報に一致する場合に当該入力パターン情報に対応付けられている出力パターン情報に含まれる識別情報が表す情報を検索することにより、情報間の意味関係に従って次の情報を順次検索することができる。また、役割情報として、原因、結果、包含関係等を表す情報を用いる場合、直接的に関係する情報を検索するだけでなく、関連する情報を推論しながら検索することができる。

【0014】(5) 第5の発明

第5の発明に係る仮説シミュレーション装置は、第1～第4のいずれかの発明に係る仮説シミュレーション装置の構成において、シミュレーション装置は、化学反応による物質の変化量をシミュレーションする化学反応シミュレーション装置を含み、化学反応シミュレーション装置は、各物質の数をカウントし、各カウント値が各物質の数を表すカウント手段と、化学反応の進行状態に応じて、カウント手段の化学反応前の各物質のカウント値を減少させるとともに、カウント手段の化学反応後の各物質のカウント値を増加させる増加/減少手段とを備えるものである。

【0015】この場合、化学反応の進行状態に応じて、カウント値が物質の数を表すカウント手段の化学反応前の各物質のカウント値が減少されるとともに、化学反応後の各物質のカウント値が増加され、化学反応による各物質の変化量がシミュレーションされる。

【0016】このように、化学反応前後の各物質の量をカウント値すなわち数(整数)として捉え、化学反応による物質の変化量をシミュレーションしているので、カウントする物質の数を増加するだけでシミュレーションに使用する物質の種類を増加させることができる。また、シミュレーションの内容を修正する場合、修正した化学反応に応じて各物質のカウント値を増減するだけで対処することができる。

【0017】この結果、シミュレーションに使用する物質の種類が多い場合でも、化学反応による物質の変化量を容易にシミュレーションすることができるとともに、シミュレーションに使用する化学反応を容易に修正することができる。

【0018】(6) 第6の発明

第6の発明に係る仮説シミュレーション装置は、第5の発明に係る仮説シミュレーション装置の構成において、カウント手段は、物質ごとに設けられ、カウント値が物質の数を表す複数の物質カウント手段を含み、増加/減少手段は、化学反応ごとに設けられ、化学反応の進行状態に応じて、化学反応前の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値を減少させるとともに、化学反応後の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値を増加させる複数の反応実行手段と、反応実行手段の化学反応に応じて反応実行手段と物質カウント手段とを接続する接続手段とを含むものである。

【0019】この場合、カウント値が物質の数を表す物質カウント手段が各物質ごとに設けられるとともに、複数の反応実行手段が化学反応ごとに設けられ、反応実行手段の化学反応に応じて反応実行手段と物質カウント手段とが接続され、化学反応前の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値が減少されるとともに、化学反応後の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値が増加される。このように、化学反応に応じて化学反応前後の各物質の量を表すカウント値を増減することにより、化学反応による物質の変化量をシミュレーションすることができる。

【0020】また、物質カウント手段の数を増加するだけでシミュレーションに使用する物質の種類を増加させることができるとともに、反応実行手段の化学反応に応じて反応実行手段と物質カウント手段との接続状態を変更することにより、任意の化学反応を容易にシミュレーションすることができる。

【0021】(7) 第7の発明

第7の発明に係る仮説シミュレーション装置は、第6の発明に係る仮説シミュレーション装置の構成において、増加/減少手段は、所定の乱数を発生させる乱数発生手段をさらに含み、反応実行手段は、乱数発生手段から出力される乱数に応じて化学反応前の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値を減少させるとともに、化学反応後の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値を増加させるものである。

【0022】この場合、乱数発生手段から出力される乱数に応じて化学反応前の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値を減少させるとともに、化学反応後の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値を増加させているので、化学反応の反応速度を乱数により等価的に表現することができ、化学反応間での反応速度の違いを考慮したシミュレーションを行うことができる。

## 【0023】(8)第8の発明

第8の発明に係る仮説シミュレーション装置は、第6または第7の発明に係る仮説シミュレーション装置の構成において、増加/減少手段は、化学反応に寄与する触媒物質ごとに設けられ、カウント値が触媒物質の数を表す複数の触媒カウント手段をさらに含み、反応実行手段は、触媒カウント手段のカウント値に応じて化学反応前の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値を減少させるとともに、化学反応後の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値を増加させるものである。

【0024】この場合、カウント値が触媒物質の数を表す複数の触媒カウント手段が触媒物質ごとに設けられ、触媒カウント手段のカウント値に応じて化学反応前の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値が減少されるとともに、化学反応後の各物質の量を表す物質カウント手段のカウント値が増加される。このように、触媒物質の量をカウント値すなわち数(整数)として捉え、触媒による化学反応の反応速度に応じたシミュレーションを行うことができ、触媒による影響を考慮したシミュレーションを行うことができる。

## 【0025】(9)第9の発明

第9の発明に係る仮説シミュレーション方法は、知識として蓄積されている情報を用いて推論により仮説を生成するステップと、生成された仮説をシミュレーションするステップと、シミュレーションされた結果を用いて知識として蓄積されている情報を組織化するステップとを含むものである。

【0026】本発明に係る仮説シミュレーション方法においては、知識として蓄積されている情報を用いて推論により仮説が生成され、生成された仮説がシミュレーションされ、シミュレーションされた結果を用いて知識として蓄積されている情報が組織化されるので、知識として蓄積されている情報から推論された仮説を検証して知識として蓄積されている情報を自己組織化することができる。

## 【0027】

【発明の実施の形態】以下、本発明の一実施の形態による仮説シミュレーション装置について図面を参照しながら説明する。図1は、本発明の一実施の形態による仮説シミュレーション装置の構成を示すブロック図である。

【0028】図1において、仮説シミュレーション装置は、仮説推論装置100およびシミュレーション装置200を備える。

【0029】仮説推論装置100は、知識として蓄積されている知識情報を用いて推論により仮説を生成する。シミュレーション装置200は、仮説推論装置100により生成された仮説をシミュレーションする。また、仮説推論装置100は、シミュレーション装置200によりシミュレーションされた結果を用いて知識情報を組織化する。

【0030】たとえば、図1に示す仮説シミュレーション装置を遺伝子ネットワーク研究の展開および支援のために用いる場合、仮説推論装置100は、知識情報を自己組織化する自己組織化知識基盤システムとして機能し、シミュレーション装置200は、多細胞生物の遺伝子ネットワークをシミュレーションし、その結果を仮説推論装置100へ出力する。このように、仮説推論装置100が仮説を生成し、シミュレーション装置200が仮説を検証し、仮説推論装置100が検証結果を用いて学習して新たな仮説を生成する。

【0031】具体的には、仮説推論装置100は、実験条件を提案し、提案した実験条件に基づく生物実験の結果により知識情報を更新したり、専門書、文献および関連データベースから概念および意味関係を抽出したり、新たな知識や情報を評価および更新すること等により知識情報を自己組織化する。また、仮説推論装置100は、所定のユーザインターフェースを用いてDNA、タンパク質、遺伝子ネットワーク、細胞等を可視化したり、構造化された知識情報を可視化することにより、所望の情報を検索したり、検索および推論結果を表示する。

【0032】また、シミュレーション装置200は、仮説推論装置100により生成された仮説および設定された条件、および所定のユーザインターフェースを用いて設定されたシミュレーション条件に応じて細胞数約100万個の遺伝子ネットワークを実時間の約1000倍の速度でシミュレーションする。仮説推論装置100は、シミュレーション装置200によりシミュレーションされた結果を用いて知識情報を組織化する。このようにして、仮説の生成、仮説の検証、検証結果の学習の各動作が繰り返され、知識情報が自己組織化される。

【0033】本実施の形態では、仮説推論装置100が仮説推論装置に相当し、シミュレーション装置200がシミュレーション装置に相当する。

【0034】上記のように、本実施の形態では、知識情報を用いて推論により仮説が生成され、生成された仮説がシミュレーションされ、シミュレーションされた結果を用いて知識情報が組織化されるので、知識情報から推論された仮説を検証して知識情報を自己組織化することができる。したがって、非常に多くのDNAを解析して膨大なゲノムデータを統合および分類し、機能的に関連のある遺伝子群からなる遺伝子ネットワークを実用的な時間内に解析することができる。

【0035】次に、図1に示す仮説推論装置100について詳細に説明する。図2は、図1に示す仮説推論装置100の構成を示すブロック図である。

【0036】図1において、仮説推論装置100は、入力部1、検索推論部2、データベース部3、出力部4、および構造構築部5を備える。

【0037】入力部1は、利用者から入力された情報お

およびシミュレーション装置 200 のシミュレーション結果を検索推論部 2 へ出力する。利用者が入力する情報としては、検索すべき情報、この情報のタイプ情報および役割情報等がある。

【0038】検索推論部 2 は、入力部 1 から入力された情報に該当する情報をデータベース部 3 から検索し、検索結果から仮説を推論して出力部 4 へ出力する。

【0039】データベース部 3 は、均質化 2 部グラフモデル (HBM: Homogenized Bipartite model) により表現される複数の情報を構造化して予め記録している。各情報は、当該情報を表す識別情報としてその名前がデータベース部 3 に記録されるとともに、当該情報と関連する他の情報との意味関係を記述する複数のルールがデータベース部 3 に記録されている。

【0040】各ルールは、情報のタイプに応じて概念、関係および属性に区分され、概念、関係および属性のうちの 1 つがタイプ情報として記録されるとともに、当該ルールが対応付けられている情報への入力パターンを規定する入力パターン情報と、この入力パターン情報に対応付けられた出力パターン情報とが記録されている。

【0041】入力パターン情報としては、検索された情報へ到達する前の情報の識別情報である情報の名前および当該情報の役割を表す役割情報が記録され、出力パターン情報としては、次に検索すべき情報の識別情報である情報の名前、当該情報のタイプ情報および役割情報が記録されている。

【0042】出力部 4 は、検索推論部 2 により検索および推論された情報を出力し、例えば表示画面に検索結果を表示したり、紙媒体に検索結果を印字したり、また、検索推論部 2 により推論された仮説をシミュレーション装置 200 へ出力する。

【0043】構造構築部 5 は、入力部 1 を介して新たに入力された情報およびシミュレーション結果をデータベース部 3 に上記のデータ構造に従って記録させたり、検索推論部 2 により検索および推論された結果を参照して新たな情報を上記のデータ構造に従ってデータベース部 3 に記録させ、情報の意味関係に基づき情報全体を組織化して新たなデータベースを自動構築する。

【0044】構造構築部 5 におけるデータベースの自動構築には、階層関係 (上位語、下位語) を抽出する C-TRAN (Constrained Transitive Closure) 法、造語規則に基づき階層関係および関連関係を抽出する SS-KWIC (Semantically Structured Key Word element Index in terminological Context) 法、特定用語に関する構文解析により主に因果関係および関連関係を抽出する SS-SANS (Semantically Specified Syntactic Analysis) 法、意味解析手法により主に因果関係を抽出する SANS (Semantic Analysis of Sentences) 法、概念間の各種関係を自動的に抽出する INTEGRAL (Integration of Domain Established Knowledge

法等の手法を用いることができる。

【0045】本実施の形態では、入力部 1 が入力手段に相当し、検索推論部 2 が検索手段に相当し、データベース部 3 が記録手段に相当し、出力部 4 が出力手段に相当する。

【0046】次に、上記の仮説推論装置 100 の情報表現モデルとして用いられる均質化 2 部グラフモデルについて説明する。均質化 2 部グラフモデルは、ハイパーグラフの多項関係や双対性をさらに拡張した相対性 (概念-関係、概念-属性等)、その他の関係に対応できる概念記憶構造である。

【0047】均質化 2 部グラフモデルは、以下の式により表現される。

$$E = 2^V \quad (1)$$

$$V = V \cup E \quad (2)$$

$$E = E \cup V \quad (3)$$

$$\sigma: L \rightarrow V \cup E \quad (4)$$

ここで、 $V$ 、 $E$ 、 $L$  は、それぞれノード、リンク、ラベルの集合 (有限とは限らない) である。

【0048】均質化 2 部グラフモデルでは、関係は、ノードを 2 つだけ結ぶのではなく、任意の数の集合すなわち多項関係に対応し、式 (1) に示すように冪集合であることを示し、これだけであれば、ハイパーグラフになる。式 (2) と式 (3) によりそれぞれ再帰構造と内部構造が許される。また、式 (2) と式 (3) の両者を合わせて、ノード (概念) とリンク (関係) は基本的に均質化されるが、ある時点では、構造の最下部にはノードとしてだけの役割を持つもの、最上部にはリンクの役割だけを持つものが存在する。一方、ノードが整礎的集合 (well founded set) ではなくなる。また、このモデルは、構造としての特徴以外に情報の含み得る量を見ると、情報の意味記述の詳細度においても従来の表現モデルより優れる。

【0049】また、階層関係の属性継承関係を辿るナビゲーションは、大部分の演繹推論に相当し、しかも単一化の計算量を著しく小さくすることが可能となる。さらに、多値論理のうち実用性から最近注目されている Rough Set Theory における識別不能関係のみならず、論理的帰結不能関係すなわち類推、帰納推論、仮説推論等への拡張も可能となる。

【0050】図 3 は、ある観点から均質化 2 部グラフモデルにより情報を表現した一例を示す図である。図 3 に示すように、情報はノード (円) で表され、意味関係のある情報 (ノード) 間にはエッジ (矢印) で接続され、接続には指向性がある。例えば、情報 2 は、情報 B と意味関係があり、さらに、情報 C、D、E と意味関係がある。

【0051】次に、上記の均質化 2 部グラフモデルに基づき情報を構造化してデータベースを構築する方法について説明する。図 4 は、均質化 2 部グラフモデルにより



一つの情報とこの情報と意味関係がある他の複数の情報を表現した図であり、図5は、図4に表現された情報のルールの記述例を説明するための模式図である。

【0052】図4に示すように、情報Cは、親情報となる情報I1～Ikと意味関係があり、さらに子情報となる情報V1～Vnと意味関係がある。ここで、k、nは任意の正数である。このように、均質化2部グラフモデルでは、任意の数の多項関係を表現することができる。

【0053】情報Cのある観点に対応する一つのルールとして、情報Cと子情報V1～Vnとの意味関係を記述する場合、図5に示すように、その観点に応じた情報Cのタイプ情報がTypeに記述され、その観点から特定される子情報V1～Vnのいずれかの名前がP1～Pm (mはn以下の正数)に記述され、その名前がP1～Pmに記述された情報ごとに、その情報の役割が役割情報としてRole1～Rolemに記述されるとともに、その情報のタイプがタイプ情報としてType1～Type mに記述される。

【0054】役割情報としては、所有関係、因果関係等の情報Cに対する子情報V1～Vnの役割が記述され、例えば、HAS (所持を表す)、CLASS (上位を表す)、BEFORE (順序の前を表す)、AFTER (順序の後を表す)、CAUSE (原因を表す)、RESULT (結果を表す)、SYNONYM (同値を表す)、OWN (所有を表す)、VALUE (値を表す)等が記述され、タイプ情報としては、概念、属性、関係のいずれかが記述される。

【0055】このようにして、ある観点から情報Cに関する一つのルールを記述することができ、情報Cに関する種々の観点から複数のルールを記述することができる。従って、複数のルールを記述することにより、同一の情報の集合に対する複数の観点からの表現が可能となる。

【0056】図6は、図2に示すデータベース部3のデータ構造を示す模式図である。上記のルールの記述方法に従い、図6に示すように、データベース部3では、各情報ごとに、当該情報 (例えば、情報1)を表す識別情報となる情報の名前DNが記録されるとともに、当該情報と関連する他の情報との意味関係を記述する複数のルールR1、R2、…が記録され、各情報が同様のフォーマットでデータベース部3に記録されている。

【0057】ルールR1、R2、…の各々には、情報の名前DNが表す情報 (例えば、情報1)のタイプ情報DT、情報の名前DNが表す情報への入力パターンを規定する少なくとも1つの入力パターン情報I1、I2、…、およびこれらの入力パターン情報に対応する一つの出力パターン情報OPが記録されている。各入力パターン情報I1、I2、…には、情報の名前DNが表す情報へ到達する前の情報 (例えば、情報A)の識別情報となる情報の名前INおよび役割情報IRが記録され、出力

パターン情報OPには、次に検索される情報 (例えば、情報a)の識別情報となる情報の名前ON、タイプ情報OT、役割情報ORがそれぞれ記録されている。なお、情報の名前INにより表される情報は一つの入力パターン情報内で重複せず、情報の名前ONにより表される情報も一つの出力パターン情報内で重複しない。

【0058】このようにして、情報のタイプごとに分類されたルールR1、R2、…により情報間の意味関係を記述することができ、各情報に対応付けられた複数のルールR1、R2、…により1つの情報を複数の観点から表現することができる。また、入力パターン情報I1、I2、…および出力パターン情報OPに情報の役割を表す役割情報IR、ORが付加されているので、この役割情報IR、ORにより情報間の意味関係を完全に記述することができる。

【0059】なお、ルールのデータ構造は、タイプ情報および役割情報等に基づいて次の情報を検索できるものであれば、上記の例に特に限定されず、例えば、ルールをタイプごとに区分せずに入力パターン情報にタイプ情報を付加して、このタイプ情報を用いて入力パターンを判定するようにしてもよい。

【0060】次に、上記のデータ構造について具体例を挙げてさらに詳細に説明する。図7は、Glycolysis (解糖)と関連する情報を異なる観点から表現した図である。

【0061】まず、図7の(a)に示すように、Glycolysisに対して、Hexokinase (ヘキソキナーゼ)、Glucose (グルコース)、ATP (アデノシン三リン酸)、Glucose 6P (グルコース-6-リン酸)、ADP (アデノシン二リン酸)、H<sub>2</sub>Oとの関係を記述する場合、Glucoseは概念としてとらえられ、Hexokinase、Glucose、ATP、Glucose 6P、ADP、H<sub>2</sub>Oはその属性としてとらえられる。

【0062】また、図7の(b)に示すように、Glucoseに対して、Dextrose (デキストロース)、Grape Sugar (ぶどう糖)、Glycolysisとの関係を記述する場合、Glucoseは概念としてとらえられ、Dextrose、Grape Sugar、Glycolysisはその属性としてとらえられる。

【0063】また、図7の(c)に示すように、Hexokinase、Glucose、ATPと、Glycolysisと、Glucose 6P、ADP、H<sub>2</sub>Oとの関係を記述する場合、Hexokinase、Glucose、ATPと、Glucose 6P、ADP、H<sub>2</sub>Oとは概念としてとらえられ、これらを関係付けるGlycolysisは関係としてとらえられる。このとき、Hexokinase、Glucose、ATPの役割は原因であり、Glucose 6P、AD

P、H、の役割は結果である。

【0064】このように、Glycolysisは、ある観点では概念となり、他の観点では属性となり、さらに他の観点では関係となる。このため、本実施の形態では、上記のように、情報のタイプを関係、概念および属性の3つに分け、各タイプごとにルールを記述するとともに、各ルールを記述する際、各情報のタイプ情報および役割情報を用いて記述しているため、以下のように、Glycolysisを複数の観点から記述することができる。

【0065】図8は、図7に示すGlycolysisをデータベース部3内に記録する場合の具体的なデータ構造を示す図である。図8に示すように、情報の名前DNとしてGlycolysisが記録され、タイプ情報DTとして関係が記録され、関係に属するルールの入力パターン情報Iとして、Hexokinaseおよび原因と、Glucoseおよび原因と、ATPおよび原因とが記録され、その出力パターン情報として、結果、概念およびGlucose 6Pと、結果、概念およびADPと、結果、概念およびH、とが記録され、図7の(c)に示す意味関係を記述することができる。

【0066】また、タイプ情報DTとして概念が記録されたルールの入力パターン情報Iとして、生体内反応およびCLASSが記録され、その出力パターン情報として、HAS、属性およびHexokinaseと、HAS、属性およびGlucoseと、HAS、属性およびATPと、HAS、属性およびGlucose 6Pと、HAS、属性およびADPと、HAS、属性およびH、とが記録され、図7の(a)に示す意味関係を記述することができる。

【0067】このようにして、本実施の形態では、ルールを情報のタイプごとに分類するとともに、役割情報を含む入力パターン情報と役割情報およびタイプ情報を含む出力パターン情報とを用いているので、情報間の意味関係を完全に記述することができる。

【0068】次に、図1に示すシミュレーション装置200の一例として、生化学反応をシミュレーションし、シグナル伝達ネットワーク、遺伝子ネットワーク等の解明に好適に用いられる化学反応シミュレーション装置について詳細に説明する。図9は、図1に示すシミュレーション装置200の構成を示すブロック図である。

【0069】図9に示すシミュレーション装置200は、複数の乱数発生器R1~Rn、複数の酵素カウンタK1~Kn、複数の絞回路V1~Vn、複数の反応実行回路H1~Hn、複数の物質カウンタB1~Bmおよび接続切り換え回路SWを備える。

【0070】仮説推論装置100により生成された仮説をシミュレーションするために、酵素カウンタK1~Kn、絞回路V1~Vnおよび反応実行回路H1~Hnは、シミュレーションに使用される生化学反応ごとに設

けられ、物質カウンタB1~Bmは、シミュレーションに使用される物質ごとに設けられる。

【0071】乱数発生器R1は、絞回路V1の入力側に接続され、反応実行回路H1は、絞回路V1の出力側に接続され、酵素カウンタK1は、絞回路V1に接続される。他の乱数発生器、酵素カウンタ、絞回路および反応実行回路も上記と同様に接続される。

【0072】接続切り換え回路SWは、例えば、空間スイッチ等から構成され、複数の増加指令用の入力配線I1~Inおよび減少指令用の入力配線D1~Dnと、複数の増加指令用の出力配線i1~imおよび減少指令用の出力配線d1~dmを含み、各配線がマトリクス状に配置されている。

【0073】反応実行回路H1は、接続切り換え回路SWの増加指令用の入力配線I1および減少指令用の入力配線D1に接続され、他の反応実行回路も同様に接続される。物質カウンタB1は、接続切り換え回路SWの増加指令用の出力配線i1および減少指令用の出力配線d1に接続され、他の物質カウンタも同様に接続される。

【0074】また、接続切り換え回路SWにおいて図中に黒丸で示す各配線の交点NDには、時分割ゲートおよび時分割ゲートのオン/オフを制御する保持メモリ等から構成されるスイッチ（図示省略）が配置されている。

【0075】接続切り換え回路SWは、各スイッチをオン/オフすることにより、増加指令用の入力配線I1~Inと複数の増加指令用の出力配線i1~imとの接続状態および減少指令用の入力配線D1~Dnと減少指令用の出力配線d1~dmとの接続状態を制御し、各反応実行回路H1~Hnが表す生化学反応の反応前の物質を表す物質カウンタおよび反応後の物質を表す物質カウンタと対応する反応実行回路とを接続する。

【0076】なお、接続切り換え回路SWは、上記の空間スイッチに特に限定されず、反応実行回路と物質カウンタとの接続状態を切り換えることができるものであれば、他の接続切り換え回路を用いてもよい。

【0077】物質カウンタB1~Bmは、例えば、バイナリカウンタ等から構成され、反応前の各物質の数すなわち分子数/原子数を初期カウント値として設定され、反応実行回路H1~Hnの減少指令および増加指令に応じて、そのカウント値を減少および増加させる。

【0078】なお、物質カウンタは、上記のバイナリカウンタに特に限定されず、他のカウンタを用いてもよい。例えば、代謝経路におけるクエン酸回路のような生化学反応を状態遷移と捉え、状態遷移機械（有限状態オートマトン）を組み合わせて使用する場合、物質カウンタとしてジョンソンカウンタを用いることにより、コンパクトな回路により高速にシミュレーションすることができる。

【0079】乱数発生器R1は、生化学反応の反応速度を制御するための所定の乱数を、絞回路V1を介して



反応実行回路H1に出力する。ここで、乱数発生器としては、擬似乱数を発生させる擬似乱数発生回路、カオス的な乱数を発生させるカオス発生回路、熱雑音に基づく乱数を発生させる熱雑音発生回路等を用いることができる。

【0080】擬似乱数発生回路としては、例えば、線形フィードバックシフトレジスタを用いることができる。この場合、線形フィードバックシフトレジスタが1個のレジスタから構成されると、 $2^L - 1$ の長周期を有するが、ほぼランダムな乱数を発生させることができる。

【0081】カオス発生回路としては、例えば、コンデンサと可変抵抗回路とで構成される閉ループにより不規則な信号を発生させる回路を用いることができる。この場合、カオス的な振る舞いを行う不規則な乱数を発生させることができる。

【0082】熱雑音発生回路としては、例えば、短周期のパルスと長周期のパルスによりラッチし、ラッチされた短周期のパルスのレベルを乱数として出力する回路を用いることができる。この場合、ホワイトノイズによる周期性のない乱数を発生させることができる。

【0083】酵素カウンタK1は、反応実行回路H1が表す生化学反応に使用される酵素物質の数すなわち酵素物質の分子数をそのカウント値として設定され、設定されたカウント値に応じて絞回路V1の絞比重が調整される。なお、一般の化学反応の場合は、酵素カウンタが触媒カウンタに変更され、生細胞内で作られる蛋白性の生体触媒である酵素の代わりに、触媒物質の数がそのカウント値として設定される。また、触媒（酵素）を使用しない化学反応の場合、触媒（酵素）カウンタおよび絞回路は不要となる。

【0084】例えば、乱数発生器R1が乱数として“1”または“0”のデータをランダムに発生し、酵素カウンタK1がそのカウント値に応じて“0”に対する“1”の頻度を調整して“1”または“0”のデータを出力する。このとき、絞回路V1が両データの論理積を行い、その結果を反応実行回路H1へ出力する。したがって、酵素カウンタK1のカウント値に応じて反応実行回路H1へ入力される“1”の頻度が調整される。

【0085】反応実行回路H1は、データとして“1”が入力された場合、反応を実行させるため、増加指令用の入力配線I1にカウント値を1だけ増加させるための増加指令を出力するとともに、減少指令用の入力配線D1にカウント値を1だけ減少させるための減少指令を出力する。一方、反応実行回路H1は、データとして“0”が入力された場合、反応を行わないようにするため（不実行の状態）、増加指令および減少指令を出力しない。

【0086】このとき、接続切り換え回路SW1は、減少指令用の入力配線D1と、反応実行回路H1が表す生化学反応の反応前の物質の数すなわち原子数/分子数を

表す物質カウンタに接続されている減少指令用の出力配線とを接続する。したがって、反応実行回路H1から出力される減少指令が反応前の物質に対して設けられた物質カウンタへ入力され、当該物質カウンタが自身のカウント値を1だけ減少させる。

【0087】また、このとき、接続切り換え回路SW1は、増加指令用の入力配線I1と、反応実行回路H1が表す生化学反応の反応後の物質の数すなわち原子数/分子数を表す物質カウンタに接続されている増加指令用の出力配線とを接続する。したがって、反応実行回路H1から出力される増加指令が反応後の物質に対して設けられた物質カウンタへ入力され、当該物質カウンタが自身のカウント値を1だけ増加させる。

【0088】他の乱数発生器、酵素カウンタ、絞回路および反応実行回路も、上記と同様に構成され、生化学反応に応じて上記と同様に動作する。

【0089】上記の構成により、各反応実行回路が表す生化学反応の反応速度が各反応実行回路ごとに調整され、各反応実行回路が表す生化学反応の反応前後の物質に対応する各物質カウンタが対応する反応実行回路に接続されるとともに、各反応実行回路が表す生化学反応に応じて反応前後の物質に対応する物質カウンタのカウント値が減少または増加され、複数の生化学反応が並列的にシミュレーションされる。

【0090】本実施の形態において、物質カウンタB1～Bmがカウント手段および物質カウンタ手段に相当し、反応実行回路H1～Hn、乱数発生器R1～Rn、酵素カウンタK1～Kn、絞回路V1～Vnおよび接続切り換え回路SWが増加/減少手段に相当する。また、反応実行回路H1～Hnが反応実行手段に相当し、接続切り換え回路SWが接続手段に相当し、乱数発生器R1～Rnが乱数発生手段に相当し、酵素カウンタK1～Knが触媒カウンタ手段に相当する。

【0091】図10は、図9に示すシミュレーション装置200によるシミュレーションの一例を模式的に示す図である。

【0092】図10に示す例は、glucose（グルコース）を分解する代謝過程であるGlycolysis（解糖）を示しており、hexokinase（ヘキソキナーゼ）が酵素となり、glucoseおよびATP（アデノシン三リン酸）からglucose 6P（グルコース-6-リン酸）、ADP（アデノシン二リン酸）およびH<sub>2</sub>Oが生成される。

【0093】この例では、まず、乱数発生器Rから所定の乱数が絞回路Vへ入力される。このとき、酵素カウンタKには、hexokinaseの分子数がそのカウント値として設定され、hexokinaseの分子数に応じて絞回路Vの出力が絞られ、乱数発生器Rの乱数およびhexokinaseの分子量に応じて反応実行回路HによるGlycolysisの実行および不実

行が制御される。

【0094】反応実行回路Hは、反応前の物質であるglucoseおよびATPの分子数を表す物質カウンタBa、Bbと、反応後の物質であるglucose 6P、ADPおよびH、の分子数/原子数を表す物質カウンタBc、Bd、Beとに接続切り換え回路(図示省略)により接続されている。

【0095】反応実行回路Hは、絞回路Vを介して出力されるデータが“1”すなわち反応を実行する場合、物質カウンタBa、Bbにそのカウント値を1だけ減少するように指示するとともに、物質カウンタBc、Bd、Beにそのカウント値を1だけ増加するように指示し、物質カウンタBa、Bbは、1だけカウント値を減少させ、物質カウンタBc、Bd、Beは、1だけカウント値を増加させる。

【0096】このようにして、図9に示すシミュレーション装置200を用い、hexokinaseを酵素としてglucoseおよびATPからglucose 6P、ADPおよびH、を生成するGlycolysisによる各物質の変化量をシミュレーションすることができる。

【0097】上記のように、本実施の形態では、乱数発生器R1~Rnおよび酵素カウンタK1~Knにより調整された反応速度に従い、反応実行回路H1~Hnが化学反応前の各物質に対応する物質カウンタB1~Bmのカウント値を減少させるとともに、反応後の各物質に対応する物質カウンタB1~Bmのカウント値を増加させ、生化学反応による各物質の変化量がシミュレーションされる。

【0098】このように、反応前後の各物質の量をカウンタ値すなわち数(整数)として捉え、生化学反応による物質の変化量をシミュレーションしているので、物質カウンタB1~Bmの数を増加するだけでシミュレーションに使用する物質の種類を増加させることができる。

【0099】また、未知の生化学反応が新たにわかった場合、病体等によりある生化学反応が欠失している場合および野生種のために生化学反応が通常と異なる場合でも、新たな生化学反応、欠損した生化学反応および通常と異なる生化学反応に応じて接続切り換え回路SWにより反応実行回路H1~Hnと物質カウンタB1~Bmとの接続状態を変更等することにより容易に対処することができる。

【0100】この結果、シミュレーションに使用する物質の種類が多い場合でも、生化学反応による物質の変化量を容易にシミュレーションすることができるとともに、シミュレーションに使用する生化学反応を容易に修正することができる。

【0101】また、本実施の形態では、各ブロックが専用の電気回路により構成されており、シミュレーションに使用する物質の種類が多い場合でも、生化学反応によ

る各物質の変化量を高速にシミュレーションすることができる。

【0102】次に、細胞内の各物質の濃度勾配を考慮して細胞内の生化学反応をシミュレーションする場合について説明する。図11は、細胞内の各物質の濃度勾配を考慮して細胞内の生化学反応をシミュレーションする方法を説明するための模式図である。

【0103】図11に示すように、細胞内の生化学反応をシミュレーションする場合、一つの細胞を複数のセルCEに空間分割し、各セルCEごとに物質の量を保持させ、セルオートマトンにより各物質の濃度勾配をシミュレーションする。すなわち、対象とするセル内の各物質の濃度(量)と近傍の6個のセル内の物質の濃度(量)とからセル間での各物質の拡散をシミュレーションする。

【0104】例えば、隣接する2つのセルC1、C2に、濃度の異なる物質1、物質2および物質3がそれぞれ含まれている場合、セルC1、C2間では、濃度の高い方から低い方へ各物質が拡散し、このセル間での拡散を以下のようにしてシミュレーションしている。

【0105】図12は、図11に示す2つのセルにおける物質の拡散をシミュレーションする場合のシミュレーション装置の構成を示すブロック図である。

【0106】図12に示すシミュレーション装置は、セルC1用の化学反応シミュレーション装置CB1、セルC2用の化学反応シミュレーション装置CB2および拡散回路KCを備える。

【0107】図12では、セルC1、C2用の化学反応シミュレーション装置CB1、CB2内に各物質カウンタB1~B3、B1'~B3'のみを図示しているが、化学反応シミュレーション装置CB1、CB2も、図1に示す化学反応シミュレーション装置と同様に構成されている。したがって、化学反応シミュレーション装置CB1、CB2も、図9に示すシミュレーション装置と同様に動作し、各セルC1、C2ごとに内部の生化学反応をシミュレーションすることができる。

【0108】また、化学反応シミュレーション装置CB1内の物質カウンタB1~B3の各カウンタ値は、セルC1内の物質1~物質3の原子数/分子数を表し、化学反応シミュレーション装置CB2内の物質カウンタB1'~B3'の各カウンタ値は、セルC2内の物質1~物質3の原子数/分子数を表し、各物質カウンタB1~B3、B1'~B3'は、拡散回路KCを介して接続されている。

【0109】拡散回路KCは、物質カウンタB1~B3、B1'~B3'のカウント値すなわち各物質の原子数/分子数に応じて各物質が拡散するように、物質カウンタB1~B3、B1'~B3'のカウント値を制御する。例えば、物質カウンタB1のカウント値が物質カウンタB1'のカウント値より大きい場合、平衡状態にな

るまで、所定の拡散速度に従い、物質カウンタB1のカウンタ値を順次減少させるとともに、これに対応させて物質カウンタB1'のカウンタ値を順次増加させる。

【0110】上記のように、細胞を複数のセルに分割し、各セルごとに生化学反応による物質の変化量をシミュレーションするとともに、隣接するセル間での各物質の拡散をシミュレーションすることにより、細胞内の各物質の濃度勾配を考慮して細胞内の物質の変化量をシミュレーションすることができる。

【0111】次に、多細胞の生化学反応をシミュレーションする場合について説明する。図13は、多細胞の生化学反応をシミュレーションする方法を説明するための概略図である。

【0112】図13に示すように、図11と同様に各細胞を複数のセルCE（図中のハッチングのないセル）に分割するとともに、細胞間に存在する細胞壁を複数の細胞壁セルWC（図中のハッチングを施したセル）に分割する。この場合、各細胞内では、図11および図12を用いて説明した細胞内のシミュレーションと同様に生化学反応がシミュレーションされる。

【0113】また、細胞壁を表す細胞壁セルWCの部分は、例えば、拡散が起こらない、すなわち細胞間で物質が拡散しないものとしてシミュレーションを行ってもよく、また、細胞壁でもある程度の拡散が行われるとして、細胞内の細胞セルと同様に拡散回路を用いて拡散をシミュレーションしてもよい。

【0114】上記のように、各細胞を複数のセルに分割するとともに、細胞壁を複数の細胞壁セルに分割し、各セルごとに生化学反応による物質の変化量をシミュレーションするとともに、細胞内で隣接するセル間の各物質の拡散等をシミュレーションすることにより、多細胞についても、その生化学反応を同様にシミュレーションすることができる。

【0115】図1に示す仮説推論装置100は、ソフトウェアを用いてワークステーション等により実現することもでき、その場合のハードウェア構成について以下に説明する。図14は、図1に示す仮説推論装置100の機能をソフトウェアにより実現する場合のハードウェア構成を示すブロック図である。

【0116】図14のCPU（中央演算処理装置）21、ROM（リードオンリメモリ）22、RAM（ランダムアクセスメモリ）23、外部記憶装置24、入力部25、および出力部26は、バス27にそれぞれ接続され、バス27を介して種々の制御信号およびデータが送受信される。

【0117】CPU21は、ROM22に記憶されている情報検索処理プログラムに従って動作してRAM23等を制御し、検索推論部2および構造構築部5の各機能を実行する。外部記憶装置24は、ハードディスクドライブ、光ディスクドライブ等の大容量の記憶装置から構

成され、データベース部3として機能し、上記のように各情報が記録される。入力部25は、キーボード、マウス等から構成され、入力部1の機能を実行する。出力部26は、ディスプレイ装置または印刷装置等から構成され、出力部4の機能を実行する。

【0118】なお、ROM22に記憶した情報検索処理プログラムは、フロッピーディスクドライブ、CD-ROMドライブ、光ディスクドライブ等の外部記憶装置により記録媒体であるフロッピーディスク、CD-ROM、光ディスク等に記録されたものを読み出し、CPU21で実行するようにしてもよい。また、インターネット等の通信媒体により伝送された情報検索処理プログラムを外部記憶装置24またはRAM23等に記憶し、記憶した情報検索処理プログラムをCPU21で実行することにより上記各機能を実現するようにしてもよい。

【0119】また、外部記憶装置24を用いずに、インターネット等の通信媒体を介してデータベース部3に対応する機能を有する他の記憶装置にアクセスすることにより、情報を検索するようにしてもよい。

【0120】また、ハードウェアとしては、外部記憶装置24内に記憶されている情報のデータ量等に応じて、パーソナルコンピュータ、ワークステーション、大型計算機等の種々のものを用いることができ、情報検索処理プログラムを記述する言語も、特に限定されず、種々のプログラミング言語を用いることができる。

【0121】次に、上記のように構成された情報検索装置の情報検索処理について詳細に説明する。図15は、図2に示す仮説推論装置による情報検索処理を説明するためのフローチャートである。

【0122】まず、利用者が入力部1を介して検索すべき情報を入力すると、ステップS1において、入力部1は、利用者が入力した情報を検索推論部2へ出力する。

【0123】次に、ステップS2において、検索推論部2は、データベース部3内に記録されている情報を検索し、入力された情報のルールをデータベース部3から読み出す。例えば、Glycolysisが入力された場合、情報の名前DNを順次検索し、情報の名前DNがGlycolysisに一致する情報に対応付けられているルールを読み出す。

【0124】次に、ステップS3において、検索推論部2は、検索した情報のすべてのルールを調べ、検索した情報への入力パターンが各ルールに記述されている入力パターン情報により規定される入力パターンに一致するか否かを判断し、入力パターンがすべてのルールの入力パターンに一致しない場合はステップS5へ移行し、一致する入力パターンがある場合はステップS4へ移行する。

【0125】例えば、検索した情報がGlycolysisであり、Glycolysisに到達する前の情報がHexokinase、Glucose、ATPであ

り、Hexokinase、Glucose、ATPの各出力パターン情報に原因、関係、Glycolysisと記述されている場合、図8に示すGlycolysisのルールのうち関係に記述されたルールを入力パターンと一致するため、ステップS4へ移行する。一方、Glycolysisに到達する前の情報にHexokinaseがない場合、Hexokinaseの出力パターン情報の役割情報およびタイプ情報が原因および関係でない場合等の場合には、図8に示すGlycolysisのすべてのルールを入力パターンと一致しないため、ステップS5に移行する。

【0126】ステップS3において入力パターンが一致する場合、ステップS4において、検索推論部2は、一致した入力パターン情報に対応付けられている出力パターン情報に規定されるすべての情報の検索を行い、ステップS3へ戻り、以降の処理を繰り返す。例えば、図8に示すGlycolysisの関係に記述されたルールを入力パターンと一致する場合、この入力パターンに対応付けられている出力パターン情報に記述されるGlucose 6P、ADP、H<sub>2</sub>Oがそれぞれの役割情報およびタイプ情報に従い、順に検索される。

【0127】このようにして、入力パターンが一致する場合、各情報が順に検索され、関連するすべての情報を検索することができる。また、役割情報としてCAUSE、RESULT等の推論動作の可能な役割情報を用いる場合、推論動作を行うことができ、直接的に関連する情報だけでなく、関連する各情報あるいは利用者が望むような情報を自動的に検索することができる。

【0128】一方、ステップS3において入力パターンが一致しないと判断された場合、ステップS5において、検索推論部2は、検索したすべての情報を出力部4へ出力し、出力部4により検索結果が表示または印字等される。なお、入力パターンが一致しない場合に作動する標準ルールを別途作成し、この標準ルールにより次に検索する情報を規定するようにしてもよい。

【0129】上記のように、本実施の形態では、均質化2部グラフモデルにより表現される複数の情報の各々が当該情報と関連する他の情報との意味関係を記述する複数のルールと対応付けられて記録され、各ルールが役割情報およびタイプ情報を含む入力パターン情報および出力パターン情報から構成されているので、情報間の意味関係を完全に記述することができ、各情報に対応付けられた複数のルールにより1つの情報を複数の観点から表現することができる。

【0130】したがって、記録された情報の中から検索すべき情報を検索し、検索した情報に対応付けられているルールに基づき関連する他の情報を検索することにより、複数の観点から情報を検索することができるとともに、各ルールを統合することにより、既に構築した他のデータベースと統合することもできる。この結果、本実

施の形態では、多様な観点から種々の情報を検索することができるとともに、データベース間の統合を容易に行うことができる。

【0131】また、図9に示すシミュレーション装置200も、ソフトウェアを用いてワークステーション等により実現することもでき、例えば、図14に示すハードウェア構成を用いて実現することができる。

【0132】図14に示すように、ソフトウェアにより、図9に示すシミュレーション装置200を構成する場合のハードウェアは、CPU21、ROM22、RAM23、外部記憶装置24、入力部25、出力部26、バス27等から構成され、CPU21、ROM22、RAM23、外部記憶装置24、入力部25および出力部26がバス27を介してそれぞれ接続され、バス27を介して種々の制御信号およびデータ等が送受信される。

【0133】CPU21は、ROM22に記憶されている化学反応シミュレーション処理プログラムに従って動作してRAM23等を制御し、乱数発生器R1～Rn、酵素カウンタK1～Kn、絞り回路V1～Vn、反応実行回路H1～Hn、物質カウンタB1～Bmおよび接続切り換え回路SWの各機能を実行する。

【0134】外部記憶装置24は、ハードディスクドライブ、光ディスクドライブ等の記憶装置から構成され、必要に応じて種々のデータを記憶する。入力部25は、キーボード、マウス等から構成され、シミュレーションに使用する物質および生化学反応等を入力するために使用される。出力部26は、ディスプレイ装置または印刷装置等から構成され、シミュレーション結果を表示またはプリントアウトする。

【0135】なお、上記のハードウェアとしては、シミュレーションに使用する物質の種類等に応じて、パーソナルコンピュータ、ワークステーション、大型計算機等の種々のものを用いることができ、化学反応シミュレーション処理プログラムを記述する言語も、特に限定されず、種々のプログラミング言語を用いることができる。

【0136】次に、上記のように構成されたシミュレーション装置の化学反応シミュレーション処理について説明する。図16は、図14に示すハードウェア構成を用いたシミュレーション装置による化学反応シミュレーション処理を説明するためのフローチャートである。

【0137】まず、ユーザが入力部25等を用いてシミュレーションに使用する物質、生化学反応および酵素等に関する必要なデータを入力したり、仮説推論装置100から同様のデータが入力されると、ステップS11において、CPU21は、入力された物質ごとに各物質の数を表すカウンタを設定するとともに、カウンタの初期値を設定する。

【0138】次に、CPU21は、以下に説明するステップS12～S17の処理を各生化学反応ごとに並列に実行し、まず、ステップS12において、所定の乱数を

発生させ、ステップS13において、酵素の数に応じて乱数を補正する。

【0139】次に、ステップS14において、CPU21は、酵素数により補正された乱数の値に応じて反応を実行するか否かを判断し、反応実行すなわち乱数の値が“1”の場合はステップS15へ移行し、反応不実行すなわち乱数の値が“0”の場合はステップS12へ移行し、次の乱数を算出する。

【0140】反応を実行させる場合、CPU21は、ステップS15において、反応前の物質の分子数/原子数を表すカウンタのカウンタ値を1だけ減少させるとともに、ステップS16において、反応後の物質の分子数/原子数を表すカウンタのカウンタ値を1だけ増加させる。

【0141】次に、ステップS17において、減少させた反応前の物質のカウンタのカウンタ値が0になっているか否かを判断し、カウンタ値が0の場合は次の反応が行われないため、処理を終了し、カウンタ値が0でない場合はステップS12へ移行し、次の反応を実行するために処理を継続する。

【0142】上記の処理により、各物質の数が初期カウンタ値として設定され、乱数および酵素の数により調整された反応速度に従い、生化学反応が実行または不実行され、反応の実行に応じて反応前の各物質のカウンタ値が減少されるとともに、反応後の各物質のカウンタ値が増加される。この結果、図9に示す化学反応シミュレーション装置と同様に、生化学反応による各物質の変化量をシミュレーションすることができ、同様の効果を得ることができる。

【0143】なお、上記の説明では、情報の具体例として、生物学に関する情報（Glycolysis等）を用いたが、本発明は、これらの情報に特に限定されず、種々の情報を用いることができ、また、用語の概念が明確な専門用語のデータベース、例えば、遺伝子データベース等に好適に用いることができる。

【0144】また、上記の説明では、化学反応として生化学反応をシミュレーションする場合について説明したが、この例に特に限定されず、種々の化学反応を上記と同様にしてシミュレーションすることができ、同様の効果を得ることができる。

#### 【図面の簡単な説明】

【図1】本発明の一実施の形態による仮説シミュレーション装置の構成を示すブロック図である。

【図2】図1に示す仮説推論装置の構成を示すブロック図である。

【図3】均質化2部グラフモデルにより情報を表現した一例を示す図である。

【図4】均質化2部グラフモデルにより一つの情報とこの情報と意味関係がある他の複数の情報を表現した図である。

【図5】図4に表現された情報のルールの記述例を説明するための模式図である。

【図6】図2に示すデータベース部のデータ構造を示す模式図である。

【図7】Glycolysisと関連する情報を異なる観点から表現した図である。

10 【図8】図7に示すGlycolysisをデータベース部内に記録する場合の具体的なデータ構造を示す図である。

【図9】図1に示すシミュレーション装置の構成を示すブロック図である。

【図10】図9に示すシミュレーション装置によるシミュレーションの一例を模式的に示す図である。

【図11】細胞内の各物質の濃度勾配を考慮して細胞内の生化学反応をシミュレーションする方法を説明するための模式図である。

20 【図12】図11に示す2つのセルにおける物質の拡散をシミュレーションする場合のシミュレーション装置の構成を示すブロック図である。

【図13】多細胞の生化学反応をシミュレーションする方法を説明するための概略図である。

【図14】図1に示す仮説推論装置の機能をソフトウェアにより実現する場合のハードウェア構成を示すブロック図である。

【図15】図2に示す仮説推論装置による情報検索処理を説明するためのフローチャートである。

30 【図16】図14に示すハードウェア構成を用いたシミュレーション装置による化学反応シミュレーション処理を説明するためのフローチャートである。

#### 【符号の説明】

1 入力部

2 検索推論部

3 データベース部

4 出力部

5 構造構築部

100 仮説推論装置

40 200 シミュレーション装置

R1~Rn 乱数発生器

K1~Kn 酵素カウンタ

V1~Vn 絞り回路

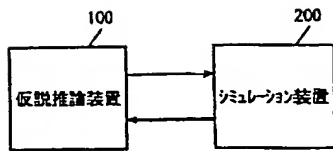
H1~Hn 反応実行回路

B1~Bm 物質カウンタ

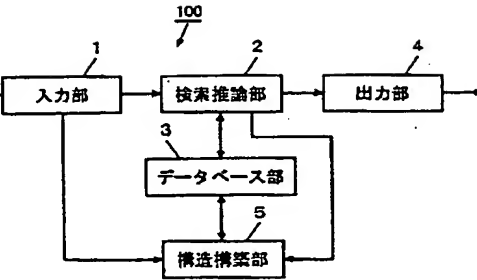
CB1, CB2 化学反応シミュレーション装置

KC 拡散回路

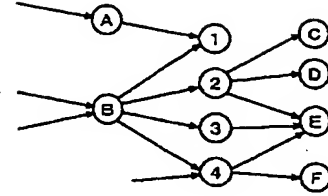
【図1】



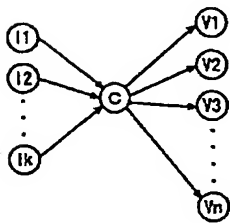
【図2】



【図3】



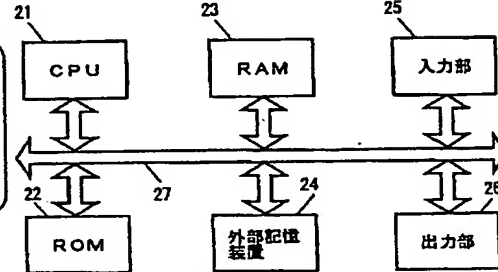
【図4】



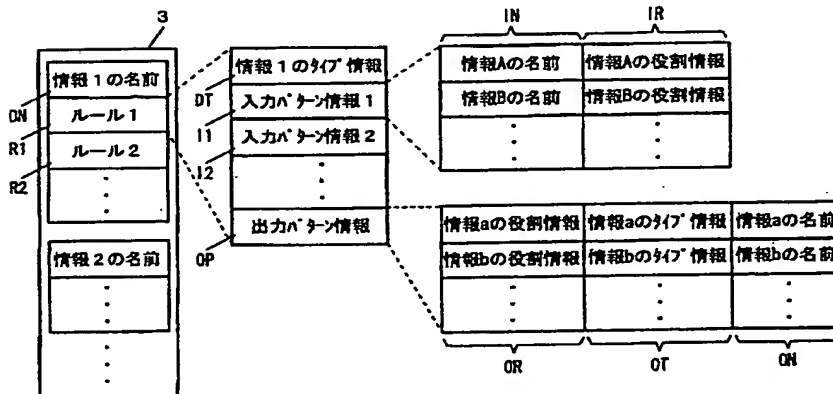
【図5】

C	Type	
Role 1	Type 1	P1
Role 2	Type 2	P2
Role 3	Type 3	P3
...	...	...
Role m	Type m	Pm

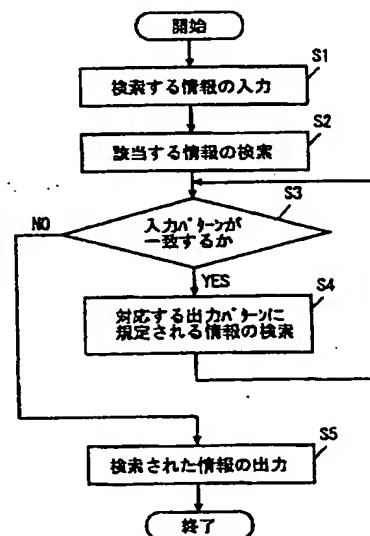
【図14】



【図6】

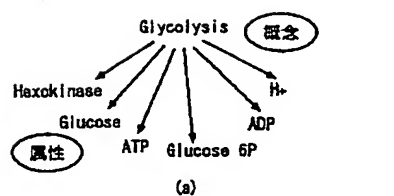


【図15】

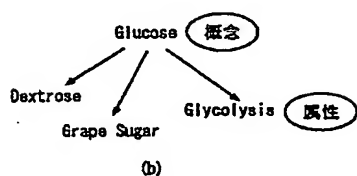




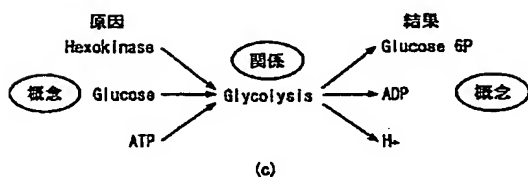
【図7】



(a)

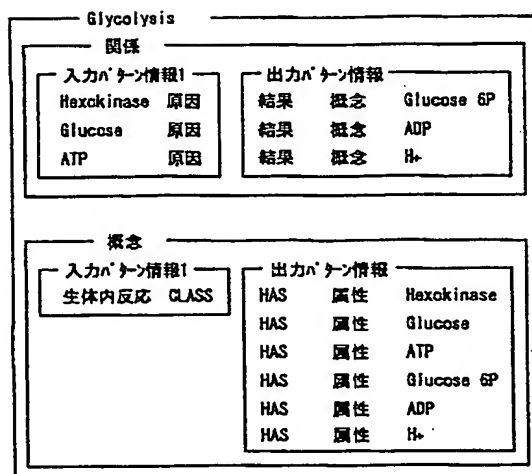


(b)

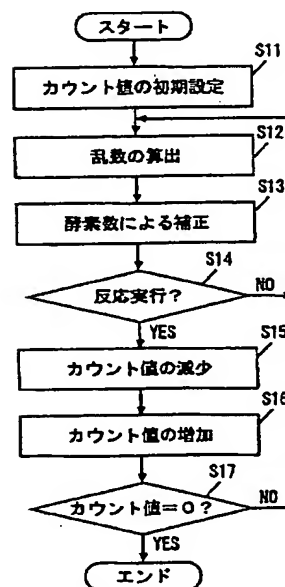


(c)

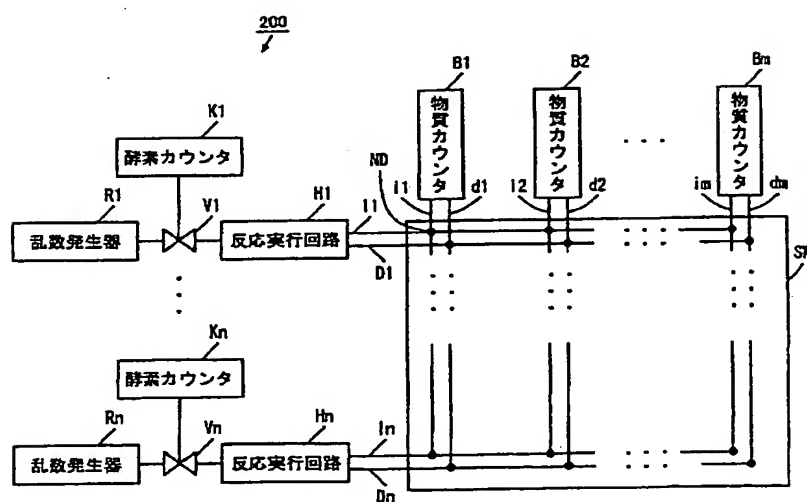
【図8】



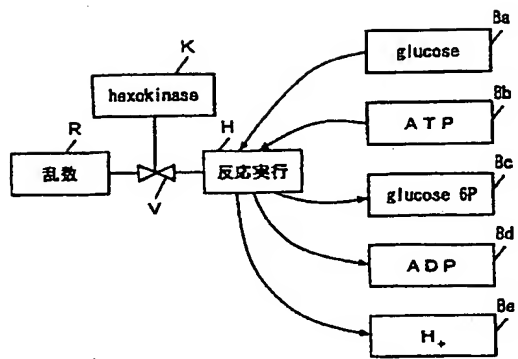
【図16】



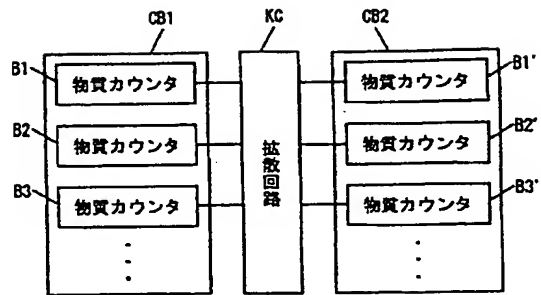
【図9】



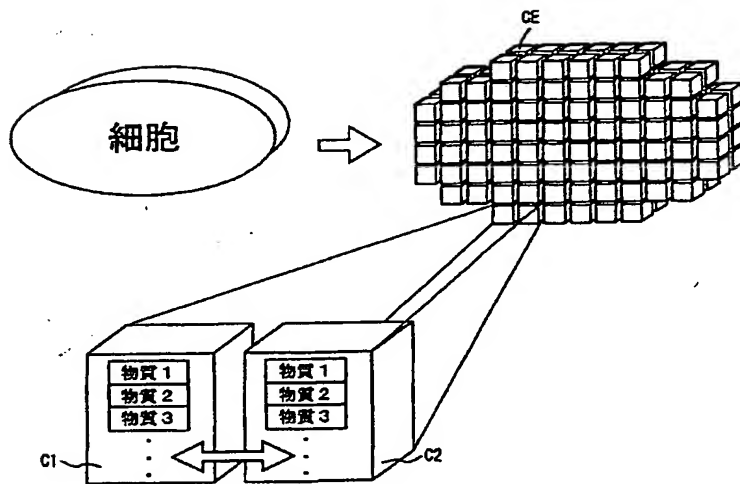
【図10】



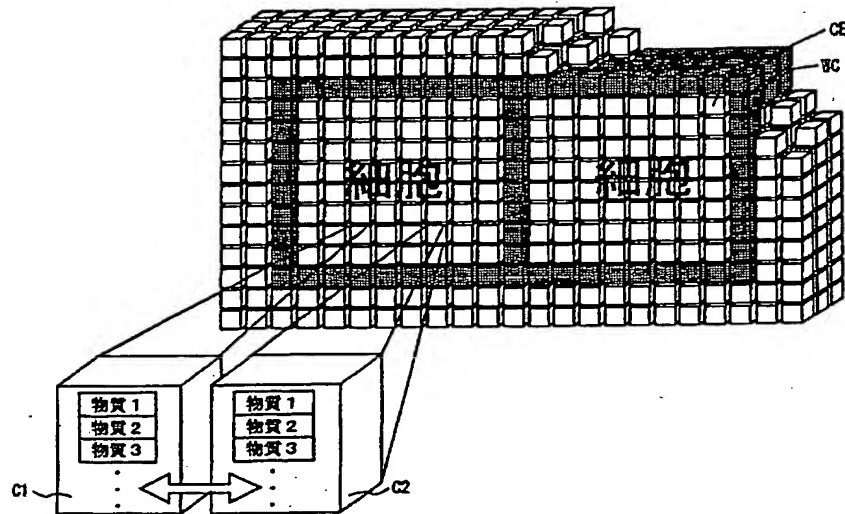
【図12】



【図11】



【図13】



フロントページの続き

(51)Int.Cl.	識別記号	F1	ターム (参考)
G 0 6 F 17/30	2 2 0	G 0 6 F 17/30	2 2 0 Z
19/00	1 1 0	19/00	1 1 0
// C 1 2 N 15/09		C 1 2 N 15/00	A

(72)発明者 下原 勝憲  
 京都府相楽郡精華町光台二丁目2番地2  
 株式会社国際電気通信基礎技術研究所内

Fターム(参考) 2G045 AA35 AA40 DA13 JA01 JA07  
 4B024 AA19 CA01 CA11 HA11 HA19  
 5B075 ND03 ND20 ND34 NK46 PP01  
 PP30 PQ05 PQ20 PR06 QM08  
 QP01 UU19